

Секція: **ФІЗИКА**

Керівники: **проф. Л.Дідух, доц. Л.Скоренький**

Секретар: **О. Сіткар**

УДК 538.935

<sup>1</sup>**П. Ваврик, <sup>2</sup>Ю. Скоренький**

<sup>1</sup> (Тернопільське обласне комунальне територіальне відділення МАН України)

<sup>2</sup> (Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя)

## **ПЕРСПЕКТИВНЕ ЗАСТОСУВАННЯ ГРАФЕНОВОЇ НАНОКОНСТРУКЦІЇ ДЛЯ АНАЛІЗУ ДНК**

Нещодавно було запропоновано новий спосіб використання двовимірного вуглецевого матеріалу – графену, вперше виділеного та дослідженого у 2004 році [1]. Цей спосіб відкриває можливість встановлення послідовності нуклеотидних основ ДНК: аденіну, гуаніну, цитозину і тиміну [2]. На сьогоднішній день усі інші доступні методи є надзвичайно вартісними та займають великий обсяг часу. Для найбільш якісного зчитування ДНК перспективно використовувати новітні наноматеріали, що дозволять значно полегшити процес встановлення основ ДНК. В роботі запропоновано використати графен, як основний матеріал для створення наноконструкції для встановлення послідовностей основ ДНК. Ланцюг ДНК або молекулу іРНК яка пройшла транскрипцію, пропускають через графенову наноконструкцію. Основним завданням методу є в довільний момент часу встановити яка основа РНК або яка пара основ ДНК знаходиться в наноконструкції, таким чином встановити послідовність усіх основ даного ланцюга. Конструкція складається з двох паралельних шарів графену. Відстань між двома графеновими площинами становить 0,34 нм, що дорівнює відстані між основами в молекулі ДНК. В центрі кожного листа розташований отвір, так звана графенова нанопора, через яку пропускається ланцюг ДНК. Графенові площини виступають у ролі електродів, на які подається певна різниця потенціалів. Коли в нанопорі з'являються різні основи ДНК, відбуваються зміни в загальній провідності конструкції, що виражаються формулою:

$$G = \frac{2e^2}{h} \frac{\Gamma_L \Gamma_R}{(\varepsilon_f - \varepsilon_0)^2},$$

де  $\Gamma_{R(L)}$  позначає ймовірність переходу електрона з верхнього шару графену на основу ДНК і з неї на нижній шар графену,  $\varepsilon_f$  – енергія Фермі графену,  $\varepsilon_0$  – енергія найвищої зайнятої молекулярної орбіталі, чи наступної за енергією орбіталі кожної основи ДНКчи РНК. Енергії орбіталей ми розраховували за допомогою програми *Firefly*, яка розв'язує стаціонарне рівняння Шредінгера за допомогою метода Хартрі-Фока. Таким чином, ми отримуємо окремі значення опору для системи, коли в ній перебуває кожна з основ ДНК. Пропускаючи невідомий ланцюг ДНК, значення опору необхідно вимірювати на кожному кроці ланцюга в 0,34 нм. Вимірюючи величини пікового опору, можна встановити послідовність основ в ланцюгу ДНК.

### **Перелік посилань**

1. Novoselov K. S., et al. Electric field effect in atomically thin carbon films // Science. –2004.– Vol. 306. – p. 666.
2. Ye Lu et al. DNA decorated graphene chemical sensors // Appl. Phys. Lett. – 2010. –Vol. 97. – p. 083107.